

(12)特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有權機關
國際事務局



(43) 国際公開日
2005年6月9日 (09.06.2005)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2005/052620 A1

| | | |
|--|-----------------------------|---|
| (51) 国際特許分類: | G01R 33/32, G01N 24/08 | Shin-ichi) [JP/JP]; 〒5650874 大阪府吹田市古江台 6-2-3 Osaka (JP). |
| (21) 国際出願番号: | PCT/JP2004/017626 | |
| (22) 国際出願日: | 2004年11月26日 (26.11.2004) | |
| (25) 国際出願の言語: | 日本語 | |
| (26) 国際公開の言語: | 日本語 | |
| (30) 優先権データ: 特願 2003-400864 | 2003年11月28日 (28.11.2003) JP | |
| (71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 技術研究組合 生物分子工学研究所 (BIOMOLECULAR ENGINEERING RESEARCH INSTITUTE) [JP/JP]; 〒5650874 大阪府吹田市古江台 6-2-3 Osaka (JP). | | |
| (72) 発明者: および | | |
| (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 植 真一 (TATE, | | |

(54) Title: METHOD OF IDENTIFYING AGONIST AND ANTAGONIST FOR TARGET PROTEIN WITH USE OF NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE TECHNIQUE, AND PROGRAM FOR USE IN THE METHOD

(54) 発明の名称: 核磁気共鳴法を用いた、標的タンパク質のアゴニストおよびアンタゴニストの同定方法、およびこの方法に用いるプログラム

(a)

$$DOC = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$$

(57) Abstract: A method of easily and speedily determining what structural change is experienced by a target protein upon contact and binding of any arbitrary compound to the target protein; a method of selecting and screening a compound for use in the method; and a computer program for carrying out these methods. In one embodiment, a Saupe order matrix element of domain is obtained from atomic coordinates of domain and an axial-direction variation of NMR signal dependent upon the orientation angle of molecule in magnetic field, and the matrix is diagonalized to thereby obtain the orientation information on the domain. Using of any change of the orientation information as an indicator for structural change enables realization of the intended easy and speedy measurement of structural change of the target protein.

(57) 要約: 本発明によって、任意の化合物が標的タンパク質と接触・結合した際に、その標的タンパク質にどのような構造変化が生じるのかを简便かつ迅速に決定する方法、そのような方法を用いる化合物の選択・スクリーニング方法、およびそのような方法を実行するためのコンピュータプログラムが提供される。

本発明の1つの実施形態において、分子の磁場中での配向角度に依存したNMRシグナルの軸方向の変化量、ドメインの原子座標から、ドメインのSaupéオーダーマトリクスエレメントを得て、そのマトリクスを対角化して、ドメインの配向情報を得る。その配向情報を変化を構造変化の指標とすることによって、

WO 2005/052620 A1